# 12. 2次元結晶平衡形と異方的界面張力:
# ランダムウォーク描像の普遍性

横浜国大·工　阿久津典子
阪大·理　阿久津泰弘

体積(2次元系では面積)一定の条件で相境界の全界面自由エネルギーを最小にする形が「平衡形」である。結晶平衡形は異方的界面張力から、Wulff 構築、あるいは Andreev 法により平衡形は求められる [1]。しかし、平衡形を完全に得るには、全方位について異方的界面張力を計算する必要があり、一般に極めて難かしい。低温での3次元平衡形はファセットとよばれる平な小面とそれをつなぐ曲面で形成される [2]。2次元界面上に作られる1次元界面から得られる2次元平衡形はファセット形と等価である [3] ことを用いれば1次元界面張力から3次元平衡形の概形を得ることができる。温度上昇にともない、ファセット面積は縮小し、その界面のラフニング転移温度でファセッティング転移とよばれる形の相転移を起こし消失する [4]。この転移の普遍的性質を議論する際や、ファセット端におけるユニバーサルな振舞い（普遍ガウス曲率不連続性）[5] を議論する際にも、1次元界面（ステップ）に着目することが重要である。

平衡状態における界面の性質はバルク·ハミルトニアンにもともと内在したものであるから、界面の性質からバルクの性質の一端がわかると考えられる。格子気体、Ising モデルなど離散的自由度を持つ系では、「界面」がミクロな立場から定義できるので界面とバルク系の関係を見通すことがより容易であると考えられる。最近、 bond crossing のない2次元平面格子 Ising モデル、およびそれに等価な free ferion 系についてバルク分配関数と1次元界面張力·2次元平衡形のあいだの厳密な関係がみいだされた [6, 7]。以下にその概要をのべる [7]。これはまた、1次元界面張力·2次元平衡形の新しい計算法を提供する。

Feynman-Vdovichenko の組合論的方法 [8] により、バルク Ising モデル分配関数はクラスター境界線を自由ランダムウォークとみなして厳密に

$$Z = const \cdot \prod_{kx=-\pi}^{\pi} \prod_{ky=-\pi}^{\pi} \sqrt{D(k_x, k_y)} \tag{1}$$

と表される。ここで $D(k_x, k_y)$ は、$\det[1 - A(k_x, k_y)]$ である。$A(k_x, k_y)$ は bond-to-bond 自由ランダムウォークを特徴づける接続行列であり、Boltzmann weight と複素因子の積から

成る。複素因子は、自由ランダムウォークからクラスター境界線として不適なパターンを正確にキャンセルするように与えられている。結晶軸から平均として角度$\theta$傾いた1次元界面について Feynman-Vdovichenko と同様な議論の後に、1次元界面張力 $\gamma(\theta)$ は、

$$\gamma(\theta) = -k_{\mathrm{B}}T \lim_{R\to\infty} \frac{1}{R} \ln \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \mathrm{d}k_x \mathrm{d}k_y \frac{e^{i\vec{k}\vec{R}(\theta)}}{D(k_x, k_y)} \tag{2}$$

となることが導ける [7]。(2) 式に表れる $D(k_x, k_y)$ は、(1) 式のものと同一であることに注意してほしい。(2) 式の右辺を $R \to \infty$ で漸近的に求めると、

$$\gamma(\theta) = k_{\mathrm{B}}T(\omega_x \cos\theta + \omega_y \sin\theta) \tag{3}$$

$$D(i\omega_x, i\omega_y) = 0 \tag{4}$$

$$\frac{\partial D}{\partial \omega_y} / \frac{\partial D}{\partial \omega_x} = \tan\theta \tag{5}$$

となる [7]。ここで、式 (4)、(5) は鞍点をきめる式であるが、収束条件から鞍点は純虚数であることが解るので $(k_x, k_y)$ を $(i\omega_x, i\omega_y)$ と変数変換してある。

実は (4) 式が結晶平衡形を直接与えていることが示せる。すなわち、結晶平衡形の座標を $(x, y)$ とすると

$$\omega_x = \frac{\lambda y}{k_{\mathrm{B}}T}, \quad \omega_y = \frac{\lambda x}{k_{\mathrm{B}}T} \tag{6}$$

である ($\lambda$は面積一定の条件から入るラグランジュ未定係数)。(5) 式は、接線を与える式であり、(3) 式は「平衡形の pedal」=「Wulff 図形」を与える式である。(1) 式と見比べて、平衡形がバルク分配関数のゼロ点を与えていることがわかる。

$D(k_x, k_y)$ の具体形はモデルに依存する。2次元正方格子 Ising モデルの場合は

$$D(k_x, k_y) = M(T) - \cos(k_x) - \cos(k_y), \tag{7a}$$

$$M(T) = \frac{\cosh(2K)}{2\sinh K}, \quad K = J/k_{\mathrm{B}}T \tag{7b}$$

となり、温度依存は $M(T)$ のみにある。すなわち平衡形の温度変化は、$\cos(k_x) + \cos(k_y)$ の等高線図として得られる。逆に、なんらかの方法で平衡形を温度の関数として得ることができれば、$D(k_x, k_y)$ の関数形がさだまり、(2) ひいては (4) 式から異方的界面張力が、(1) 式からバルク分配関数が得られる。

以上述べたことを、2次元平面格子 Ising モデル以外に適用しようとした場合、どの程度成立つかは興味深い問題である。厳密に解かれている non free fermion 系である BCSOS (body centered cubic solid-on-solid) モデルのファセット形（= 2次元平衡形）は、(7b) の

温度依存は異なるが、やはり (7a) 式で与えられることを示すことができる [7]。このことは、BCSOS モデルの 1 次元界面は本来、ミクロには自由ランダムウォークにならず (← non free fermion system) ある種の長距離相関がある系であるにもかかわらず、漸近的には界面張力が (2) 式で与えられ、自由ランダムウォークとみなして良いことを意味する。最近 3 次元 Ising モデルの step tension についても、ある $D(k_x, k_y)$ を用いると低温展開の結果 [9] が非常にきれいにまとまることを確認した [10]。これらの結果から広い範囲のモデルについて 1 次元界面の界面張力が漸近的には必ず (2) 式の形に表現できると推測される。

## 参考文献


1. G. Wulff: Z. Kristallogr. Miner. **34** (1901) 449.
   M. von Laue: Z. Kristallogr. Miner. **105** (1944) 124.
   C. Herring: Phys. Rev. **82** (1951) 87.
   A. F. Andreev: Zh. Eksp. Theor. Fiz. **80** (1981) 2042 [Sov. Phys. JETP **53** (1982) 1063].

2. J. K. MacKenzie, A. J. W. Moore and J. F. Nicholas: J. Chem. Phys. Solids **23** (1962) 185.
   C. Rottman and M. Wortis: Phys. Rep. **103** (1984) 59.

3. N. Akutsu and Y. Akutsu: J. Phys. Soc. Jpn. **56** (1987) 2248.
   M. Uwaha unpublished.

4. C. Jayaprakash, W. F. Saam and S. Teitel: Phys. Rev. Lett. **50** (1983)2017.
   C. Rottman and M. Wortis: Phys. Rev. B**29** (1984) 328.
   N. Akutsu and Y. Akutsu: J. Phys. Soc. Jpn. **56** (1987) 1443.

5. Y. Akutsu, N. Akutsu and T. Yamamoto: Phys. Rev. Lett. **61** (1988) 424.
   Y. Akutsu, N. Akutsu and T. Yamamoto: Phys. Rev. Lett. **62** (1989) 2636.
   T. Yamamoto, Y. Akutsu and N.Akutsu: J. Phys. Soc. Jpn. **57** (1988) 453.

6. M. Holzer: Phys. Rev. Lett. **64** (1990) 653.

7. Y. Akutsu and N. Akutsu: Phys. Rev. Lett. **64** (1990) 1189.

8. N. V. Vdovichenko: Sov. Phys. JETP **20** (1965) 477.

9. M. Holzer and M. Wortis: Phys. Rev. B**40** (1989) 11044.

10. N. Akutsu and Y. Akutsu: in preparation.